有理演算による実対称行列の三重対角化 (数式処理における理論と応用の研究)

関川, 浩

数理解析研究所講究録
1138 巻 2000 年 226-233

有理演算による実対称行列の三重対角化

NTT コミュニケーション科学基礎研究所
関川　浩 (Hiroshi Sekigawa)*

概　要

実対称行列を三重対角化するときに用いる Lanczos 法について, 与えられた行列の成分がすべて整数のときに, 途中経過ができるだけ整数の範囲に収まる計算法を提案する.

1　はじめに

行列の固有値計算は応用上重要な問題である. その中でも, 実対称行列の固有値計算は応用上重要であるとともに, 計算上も取り扱いやすいという特徴がある. 理論的には, 実対称行列は直交行列で対角化可能である (したがって, すべての固有値は実である). ただし, 有理演算と冪乗根の使用のみでは一般には有限ステップで対角化はできないので, 実際のアルゴリズムでは, 与えられた実対称行列を適当な中間形に相似変換したあと, 主に反復法によって固有値を求めることになる. よく使われる手法では, すべて数値計算により, 中間形として実 (対称) 三重対角行列を用い, 三重対角化には Householder 法, Lanczos 法を用いる. Householder 法, Lanczos 法とも反復法ではなく有限ステップで終了する. 三重対角行列から固有値を求めるときには, QR 法, 二分法 (Sturm) などを用いる. このあたりの一般論は, たとえば, [3], [7], [1], [4] などを参照されたい.

一方、数式処理によって固有値計算をする際にも, 行列式を展開して固有多項式を求めるのではなく, 数値計算と同様な手続きを踏んで計算する方法が考えられる. たとえば, Lanczos 法を使う場合は, 数値計算で通常使われる手法を少々変形して, 有理演算のみで処理を行う方がよい [5], [6].

本稿では, Lanczos 法について, 与えられた行列の成分がすべて整数のとき, できるだけ整数の範囲で処理が進められるよう [6] の方法を改良した計算法を提案する. これによって, modular や p 進的な方法が適用しやすくなる.

以下, 2 章で Lanczos 法について簡単に復習したあと, 3 章で, できるだけ整数の範囲で計算を進める手法を提案し, 通常の Lanczos 法や, [6] で提案した手法と計算結果を比較する. 最後に, 4 章で今後の課題を挙げる.

*sekigawa@cslab.kecl.ntt.co.jp

2 Lanczos法の復習

2.1 Lanczos法の原理

A を $n\times n$ の実対称行列とする．初期ベクトル v_1 $(\neq 0)$ を選び，Av_1 を，v_1 と，それに直交する v_2 $(\neq 0)$ のスカラー倍との和で書く．すなわち，

$$Av_1 = t_{11}v_1 + t_{21}v_2, \qquad (v_1, v_2) = 0.$$

なお，v_1 の取り方，$t_{k,k-1}$ の決め方は後述する．

次いで，Av_2 を，v_1, v_2 が張る部分空間内のベクトルと，それに直交するベクトル v_3 $(\neq 0)$ のスカラー倍との和で書く．すなわち，

$$Av_2 = t_{12}v_1 + t_{22}v_2 + t_{32}v_3, \qquad (v_1, v_3) = (v_2, v_3) = 0.$$

一般に，最後に決まったベクトル v_{k-1} $(\neq 0)$ を A で変換したベクトル Av_{k-1} を，$v_1, \ldots,$ v_{k-1} が張る部分空間内のベクトルと，その部分空間に直交するベクトル v_k $(\neq 0)$ のスカラー倍との和で書く．すなわち，

$$\begin{gathered} Av_{k-1} = t_{1,k-1}v_1 + \cdots + t_{k-1,k-1}v_{k-1} + t_{k,k-1}v_k, \\ (v_1, v_k) = \cdots = (v_{k-1}, v_k) = 0. \end{gathered}$$

ただし，最後の v_n については，

$$Av_n = t_{1n}v_1 + \cdots + t_{n-1,n}v_{n-1} + t_{nn}v_n.$$

注意 1 もし，途中で $t_{k,k-1} = 0$ となった場合は，v_k として，

$$(v_1, v_k) = \cdots = (v_{k-1}, v_k) = 0$$

となる適当なベクトルをとる．

このとき，以下の定理が成り立つ．

定理 2 $V = (v_1, \ldots, v_n)$, $T = (t_{ij})$ とする．V は作り方から正則であり，$V^{-1}AV = T$ は三重対角行列になる．すなわち，以下の形である．

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & 0 \\ \gamma_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & \\ & \gamma_2 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ 0 & & & \gamma_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}$$

証明 v_k の決め方から, $AV = VT$, かつ, T は $i > j+1$ のとき $t_{ij} = 0$, すなわち, 以下の形（Hessenberg 行列）になる.

$$\begin{pmatrix} * & & \cdots & & * \\ * & & & & \\ & * & & & \vdots \\ & & \ddots & & \\ 0 & & & * & * \end{pmatrix}$$

しかも, ${}^tVAV = {}^tVVT$ であって, v_k の決め方から ${}^tVV$ は対角成分が 0 ではない対角行列となり, ${}^tVVT$ は対称行列, $T = ({}^tVV)^{-1}({}^tVAV)$ は三重対角行列になる. ∎

2.2 計算法の概略

数値計算では, 通常は, $\|v_k\| = 1$ ととる. これは, 計算法が簡単になること, および, 誤差の点で有利なためである. このとき, V は直交行列となり, ${}^tVV = I$ より, T は対称行列となる.

1. 初期ベクトル v_1 ($\|v_1\| = 1$) を選ぶ. $Av_1 = \alpha_1 v_1 + \beta_1 v_2$ より,

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= (v_1, Av_1), \\ \beta_1 &= \|Av_1 - \alpha_1 v_1\|, \\ v_2 &= (Av_1 - \alpha_1 v_1)/\beta_1. \end{aligned}$$

2. 一般に, $Av_k = \beta_{k-1}q_{k-1} + \alpha_k v_k + \beta_k v_{k+1}$ より,

$$\begin{aligned} \alpha_k &= (v_k, Av_k), \\ \beta_k &= \|Av_k - \beta_{k-1}v_{k-1} - \alpha_k v_k\|, \\ v_{k+1} &= (Av_k - \beta_{k-1}v_{k-1} - \alpha_k v_k)/\beta_k. \end{aligned}$$

なお, v_{k+1} はその -1 倍をとってもよいが, ここでは β_k が非負となるようにとっている.

さらに, v_{k-1} と v_k から v_{k+1} を決定する方法（局所的直交化）は, 誤差のため大域的直交性を失いやすい. そのために再直交化などの処理が必要となる（[1] および, そこに挙がっている参考文献を参照のこと）.

3 提案手法

この章では, できるだけ整数の範囲で計算する方法を提案する. 計算の過程は, 初期ベクトル v_1 をどう取るかに大きく依存する. しかし, 本稿ではこの問題は対象外とし, 今後, す

べて,

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

とする.

2.1 節からわかる通り, 初期ベクトル v_1 に対してベクトル $t_{k,k-1}v_k$ は一意に決まる. それを, $t_{k,k-1}$ と v_k にどのように分けるかが工夫のしどころである.

[6] では, $t_{k,k-1}=1$ とした. このとき, A, v_1 の成分がすべて有理数ならば, v_k, T の成分もすべて有理数となる. さらに, 可能ならば, A, v_1 の成分がすべて整数のとき, できるだけ整数の範囲で計算できることが望ましい. しかし, 残念ながら, $t_{k,k-1}=1$ とする方法では, 一般には途中経過が整数の範囲には収まらない.

そこで, まず, 初期ベクトル v_1 から出発したときの, $t_{k,k-1}$ の決め方の違いによる影響を見ていく. 以下, 話を簡単にするため, 計算の途中でつねに $t_{k,k-1} \neq 0$ と仮定する.

命題 3 同じ初期ベクトル $v_1 = v'_1$ から出発したとき, $V=(v_1,\dots,v_n)$ と $V'=(v'_1,\dots,v'_n)$ の関係は以下の通りとなる.

$$\alpha'_k = \alpha_k, \qquad \beta'_k\gamma'_k = \beta_k\gamma_k > 0.$$

証明 $v'_k = s_k v_k$ $(s_k \neq 0)$ と書ける. S を, (k,k) 成分が s_k である対角行列とすると, $V' = VS$ である.

$$AV = VT, \qquad AV' = V'T',$$

とする.

$$T' = V'^{-1}AV' = S^{-1}V^{-1}AVS = S^{-1}TS$$

より,

$$\alpha'_k = \alpha_k, \qquad \beta'_k\gamma'_k = \beta_k\gamma_k.$$

各ステップで $\|v_k\|=1$, $\beta_{k-1}>0$ と正規化した場合は $\beta_k=\gamma_k$ だから, $\beta'_k\gamma'_k=\beta_k\gamma_k$ は正である. ∎

注意 4 命題 *3* より, 最後にまとめて開平を行って対称行列とすることにより, 通常の *Lanczos* 法の結果を得ることができる. また, $\beta_k\gamma_k>0$ より, 非対称のままでも二分法 *(Sturm)* が使える (*[3]* の *pp. 87–88, [2]* の *p. 44* など).

3.1 計算法の概略

A を, 成分がすべて整数である $n \times n$ の対称行列とし, 成分がすべて整数である初期ベクトル v_1 ($\neq 0$) をとる. 計算すべきものは, 以下の α_k, β_k, γ_k, v_k である.

- $k = 1$ のとき,

$$Av_1 = \alpha_1 v_1 + \gamma_1 v_2.$$

- $2 \le k \le n-1$ のとき,

$$Av_k = \beta_{k-1} v_{k-1} + \alpha_k v_k + \gamma_k v_{k+1}.$$

- $k = n$ のとき,

$$Av_n = \beta_{n-1} v_{n-1} + \alpha_n v_n.$$

上記関係式に対して, 直交関係 $(v_i, v_j) = 0$ $(i \neq j)$ を使って, α_k, β_k, γ_k, v_k を計算する. v_k は整数ベクトルとなるようにし, α_k, β_k, γ_k (一般には整数ではない) についても, なるべく整数の範囲で計算を進めることができるよう, 以下の通り補助的に a_k, b_k, c_k をとる.

- $k = 1$ のとき,

$$a_1 = (v_1, v_1), \qquad b_1 = (Av_1, v_1),$$

$$\alpha_1 = \frac{b_1}{a_1}, \qquad \gamma_1 = \frac{1}{a_1},$$

$$v_2 = a_1 A v_1 - b_1 v_1.$$

- $2 \le k \le n$ のとき,

$$a_k = (v_k, v_k), \qquad b_k = (Av_k, v_k), \qquad c_{k-1} = (Av_k, v_{k-1}),$$

$$\alpha_k = \frac{b_k}{a_k}, \qquad \beta_{k-1} = \frac{c_{k-1}}{a_{k-1}}, \qquad \gamma_k = \frac{1}{a_k},$$

$$v_{k+1} = a_k A v_k - \frac{a_k c_{k-1}}{a_{k-1}} v_{k-1} - b_k v_k.$$

- $k=n$ のとき,

$$a_n = (v_n, v_n), \qquad b_n = (Av_n, v_n), \qquad c_{n-1} = (Av_n, v_{n-1}),$$

$$\alpha_n = \frac{b_n}{a_n}, \qquad \beta_{n-1} = \frac{c_{n-1}}{a_{n-1}}.$$

定理 5 上記記号の下で, a_k, b_k, c_k は整数で $a_{k-1}|a_k$ であり, v_k は整数ベクトルである.

証明 $v_k \in \mathbb{Z}^n$ であることをいえば, $a_k, b_k, c_k \in \mathbb{Z}$ もいえる.
k についての帰納法による.
$v_1, v_2 \in \mathbb{Z}^n$ は成り立つ.

$$a_2 = \|v_2\|^2 = \|a_1Av_1 - b_1v_1\|^2 = a_1^2\|Av_1\|^2 - a_1b_1^2$$

より, $a_1|a_2$ が成立する.
次に, $k \geq 2$ とし, v_{k-1}, $v_k \in \mathbb{Z}^n$ および $a_{k-1}|a_k$ を仮定する.
まず, v_{k+1} の決め方から $v_{k+1} \in \mathbb{Z}^n$ が成り立つ.
さらに,

$$\begin{aligned} a_{k+1} &= \|v_{k+1}\|^2 = \left\| a_kAv_k - \frac{a_kc_{k-1}}{a_{k-1}}v_{k-1} - b_kv_k \right\|^2 \\ &= a_k^2\|Av_k\|^2 - \frac{a_k^2c_{k-1}^2}{a_{k-1}} - a_kb_k^2 \end{aligned}$$

より, $a_k|a_{k+1}$ が成立する. ∎

3.2 計算例

この節では,

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 5 & 7 \\ 3 & 5 & 7 & 11 \\ 5 & 7 & 11 & 13 \\ 7 & 11 & 13 & 17 \end{pmatrix}, \qquad v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

に対して, 各方法による計算結果を示す.

例 6 通常の *Lanczos* 法（ただし, 計算はすべて厳密に行う）では, 以下の通りとなる.

$$T = \begin{pmatrix} 2 & \sqrt{83} & 0 & 0 \\ \sqrt{83} & \frac{2735}{83} & \frac{2\sqrt{20414}}{83} & 0 \\ 0 & \frac{2\sqrt{20414}}{83} & \frac{-1019165}{847181} & \frac{537\sqrt{83}}{10207} \\ 0 & 0 & \frac{537\sqrt{83}}{10207} & \frac{12771}{10207} \end{pmatrix},$$

$$V = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{\sqrt{83}} & \frac{1168}{\sqrt{1694362}} & \frac{42}{\sqrt{20414}} \\ 0 & \frac{5}{\sqrt{83}} & \frac{93}{\sqrt{1694362}} & \frac{-119}{\sqrt{20414}} \\ 0 & \frac{7}{\sqrt{83}} & \frac{-567}{\sqrt{1694362}} & \frac{67}{\sqrt{20414}} \end{pmatrix}.$$

例 7 $\gamma_k = 1$ とする方法 *[6]* では, 以下の通りとなる.

$$T = \begin{pmatrix} 2 & 83 & 0 & 0 \\ 1 & \frac{2735}{83} & \frac{81656}{6889} & 0 \\ 0 & 1 & \frac{-1019165}{847181} & \frac{23934627}{104182849} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{12771}{10207} \end{pmatrix},$$

$$V = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 2336/83 & 45108/10207 \\ 0 & 5 & 186/83 & -127806/10207 \\ 0 & 7 & -1134/83 & 71958/10207 \end{pmatrix}.$$

例 8 今回の提案手法では, 以下の通りとなる.

$$T = \begin{pmatrix} 2 & 83 & 0 & 0 \\ 1 & \frac{2735}{83} & \frac{81656}{83} & 0 \\ 0 & \frac{1}{83} & \frac{-1019165}{847181} & \frac{15892592328}{10207} \\ 0 & 0 & \frac{1}{6777448} & \frac{12771}{10207} \end{pmatrix},$$

$$V = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 2336 & 2485992096 \\ 0 & 5 & 186 & -7043644272 \\ 0 & 7 & -1134 & 3965749296 \end{pmatrix}.$$

例 8 でわかる通り, 今回の提案手法では, v_k の成分に GCD をとる余地が残っている. すなわち, v_k が整数ベクトルであるという性質を保ちつつ, もう少し成分の膨張を押さえることが可能である.

4 おわりに

今後の課題として, まず, 成分の膨張の理論的な解析がある. また, 3.2 節の最後に注意した通り, 計算の途中で v_k の成分の GCD をとる余地が残っている. すなわち, 今回の提案手法は,

$$Av_k = \beta_{k-1}v_{k-1} + \alpha_k v_k + \gamma_k v_{k+1}$$

において, α_k, β_{k-1}, γ_k の分母を払うために (v_k, v_k) を掛けているが, α_k, β_{k-1}, γ_k の分母をもう少し正確に見て, v_{k+1} の成分の GCD ができるだけ小さくなるようにする方法も考えられる. ただし, GCD を 1 とするのはコストがかかるので, 成分の膨張の度合いとのトレードオフの問題になるであろう.

そして, 本来の目標である固有値の計算に向けて, 三重対角化以降の計算, また, modular や p 進的な手法の導入の可能性についての研究がある.

さらに根本的な問題として, 固有値は最終的には数値的に表現する（二分法であっても, 区間で表現するから同じ）ことを考えたとき, 最初から近似計算を行う精度可変の浮動小数による計算（悪条件の問題にも対処できる）との得失の比較が必要である.

参考文献

[1] F. Chatelin: *Valeurs propres de matrices*, Masson, Paris, 1988. （伊理正夫, 伊理由美訳：行列の固有値, シュプリンガー・フェアラーク東京, 1993.）

[2] 一松信：数値解析, 朝倉書店, 1982.

[3] A. S. Householder: *The Theory of Matrices in Numerical Analysis*, Blaisdell, 1964.

[4] 森正武, 杉原正顯, 室田一雄：線形計算（岩波講座応用数学）, 岩波書店, 1994.

[5] 村上弘：Lanczos 法による行列の固有多項式の厳密計算, 京大数理研講録究 1085「数式処理における理論と応用の研究」, pp. 108–110, 1999.

[6] 関川浩：数式処理から見た行列の数値計算アルゴリズム, 京大数理研講録究 1085「数式処理における理論と応用の研究」, pp. 132–139, 1999.

[7] J. H. Wilkinson: *The Algebraic Eigenvalue Problem*, Clarendon Press, 1965.